



TITLE:

典型元素を活用した機能性材料の開発

AUTHOR(S):

吾郷, 友宏

CITATION:

吾郷, 友宏. 典型元素を活用した機能性材料の開発. 京都大学化学研究所
スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2019, 2018: 76-76

ISSUE DATE:

2019-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/241201>

RIGHT:

典型元素を活用した機能性材料の開発

Development of functional materials by taking advantage of main group elements

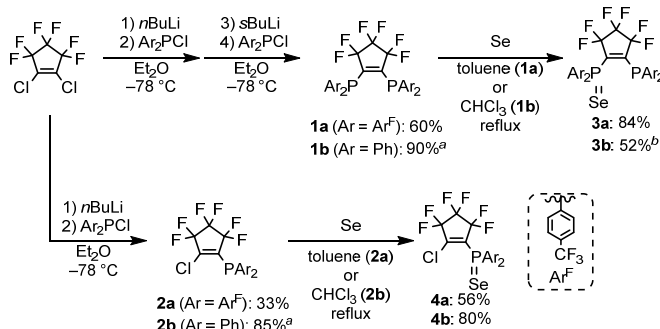
茨城大学工学部物質科学工学科 吾郷 友宏

研究成果概要

電子受容性配位子は遷移金属のルイス酸性を向上させると共に、トランスメタル化や還元的脱離を加速するため、触媒反応開発において重視されるようになってきた。我々のグループでは、強力な電子求引性骨格である 3,3,4,4,5,5-ヘキサフルオロシクロペンテン-1,2-ジイル(以下、HFCP と略す)を活用した電子不足化合物や電子受容性配位子の開発を行ってきた。今回、HFCP を架橋基とした π 受容性ホスフィンの開発と配位特性の解明、および触媒反応への利用を検討した(発表論文 1)。

HFCP 骨格を有するホスフィン

1,2 は、1,2-ジクロロヘキサフルオロシクロペンテンとクロロホスフィンから合成し、さらにセレンで処理することで *P*-セレニド **3,4** を得た。これらのセレニドは、9-ホスファトリプチセン-*P*-セレニドと同程度の $^1J_{\text{PSe}}$ 値を示し、ホスフィン **1,2** の σ 供与能



が特異的に低いことがわかった。量子化学計算からも、ホスフィン **1,2** の σ 供与性が極めて低い一方で、ホスファイト等に近い強い π 需要能を持つことが示された。ホスフィン **1,2** の触媒反応への応用を検討したところ、**1a** が Au(I)触媒によるアルキンの水合およびヒドロアリール化といった反応に活性を示すことが分かった。

その他、HFCP を導入した縮環芳香族化合物の電子状態・光物性に関し、量子化学計算を用いた理論的な検討を行った(発表論文 2, 3)。

発表論文(謝辞あり) 1) Syntheses and Structures of d^{10} Coinage Metal Complexes of Electron-Accepting Phosphine Ligands Featuring a 3,3,4,4,5,5-Hexafluorocyclopentene Framework, Agou, T.; Wada, N.; Fujisawa, K.; Hosoya, T.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N.; Fukumoto, H.; Kubota, T. *Inorg. Chem.* **2018**, 57, 9105-9114; 2) A Straightforward Synthesis of Polyfluorinated Furan Derivatives and Their Property, Agou, T.; Nemoto, S.; Yamada, S.; Konno, T.; Mizuhata, Y.; Toitoh, N.; Ebina, R.; Ishii, A.; Hosoya, T.; Fukumoto, H.; Kubota, T. *Asian J. Org. Chem.* **2018**, 7, 2484-2489; 3) Fluorine-Containing Dibenzoanthracene and Benzoperylene-Type Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: Synthesis, Structure, and Basic Chemical Properties, Gotsu, O.; Shiota, T.; Fukumoto, H.; Kawasaki-Takasuka, T.; Yamazaki, T.; Yajima, T.; Agou, T.; Kubota, T. *Molecules* **2018**, 23, 3337.